

На правах рукописи



ШЕМАХИН АЛЕКСАНДР ЮРЬЕВИЧ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОДИНАМИКИ
СТРУЙ ВЧ-ПЛАЗМЫ ПРИ ПОНИЖЕННЫХ ДАВЛЕНИЯХ

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Казань - 2012

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Желтухин Виктор Семенович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Копысов Сергей Петрович

доктор физико-математических наук,
профессор Зарипов Шамиль Хузеевич

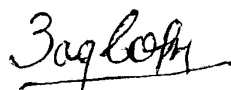
Ведущая организация: Институт прикладной математики им.
М. В. Келдыша РАН

Защита диссертации состоится « 13 » декабря 2012 г. в 17:00 часов в ауд. 218 второго учебного корпуса на заседании диссертационного совета Д 212.081.21 в ФГАОУВПО «Казанский (Приволжский) федеральный университет» по адресу: 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 35.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет».

Автореферат разослан « 12 » ноября 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.081.21,
д.ф.-м.н., профессор



Задворнов О.А.

Общая характеристика работы

Актуальность темы.

Актуальной задачей инновационного развития промышленности и проведения качественных изменений в современном индустриальном цикле является повышение надежности, долговечности изделий органической и неорганической природы и получение качественно новых свойств. Одним из эффективных способов усовершенствования характеристик материалов является их обработка в струе плазмы высокочастотного (ВЧ) разряда пониженного давления.

Плазма ВЧ-разрядов пониженного давления ($P = 13.3 - 133$ Па) с продувом газа применяется для модификации наноструктуры различных материалов, таких как сталь, титан, полиэтилен, кожа, мех и др.. Плазма, создаваемая данным видом разряда, обладает следующими свойствами: степень ионизации $10^{-7} - 10^{-4}$, концентрация электронов $n_e = 10^{15} - 10^{19} \text{ м}^{-3}$, электронная температура $T_e = 1 - 4$ эВ, температура атомов и ионов в плазменном сгустке $T_a = 0.2 - 0.3$ эВ, в плазменной струе $T_a = 0.03 - 0.07$ эВ.

За последние десятилетия накоплены обширные экспериментальные данные о свойствах плазмы ВЧ-разрядов пониженного давления, результатах взаимодействия ее с различными материалами, созданы математические модели, учитывающие электродинамику и плазмодинамику ВЧ-разрядов. Однако, параметры течения ВЧ-плазмы получены эмпирическим путем в лабораторных условиях для ограниченного набора параметров разрядов и плазмотронов, а существующие математические модели ВЧ-плазмы пониженного давления, не учитывают газодинамику потока струи и тем самым не позволяют адекватно описать процесс обработки материалов.

Для более эффективного и качественного выбора конструктивных решений при создании струйных ВЧ-плазменных установок и проектирования технологических процессов с использованием струйных ВЧ-разрядов пониженного давления необходимо создание математической модели течения ВЧ-плазмы, с помощью которой можно проводить исследования закономерностей формирования характеристик потока плазмы, а следовательно и параметров плазменной обработки путем теоретических расчетов, что уменьшит затраты на проведение большого количества дорогостоящих и трудоемких экспериментов.

Течение плазмы в диапазоне давлений $P = 13.3 - 133$ Па при расходе газа $G = 0 - 0.24$ г/с происходит в переходном режиме между течением сплошной среды и свободно-молекулярным потоком, так как число Кнудсена Kn для несущего газа находится в диапазоне $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$. Для таких течений модели сплошной среды типа уравнений Навье-Стокса не применимы. В связи с этим, задача моделирования газодинамики струй

ВЧ-плазмы пониженного давления является актуальной.

Диссертационная работа направлена на решение задачи математического моделирования газодинамики струй ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме при числе Кнудсена Kn для несущего газа $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$.

В диссертации изложены работы автора в период с 2009 по 2012 г.г. по созданию математической модели, разработке численного метода и комплекса программ расчета характеристик струйного течения ВЧ-плазмы при пониженных давлениях.

Работа выполнена в Казанском федеральном университете при финансовой поддержке грантов РФФИ 11-01-00864-а, 12-01-31458 мол-а и Минобрнауки РФ по госконтрактам № 14.132.21.1420 и № 14.740.11.0080.

Целью работы является разработка математической модели, численного метода и комплекса программ для расчета характеристик струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме в диапазоне чисел Кнудсена $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$.

Поставленная цель потребовала **решения следующих задач:**

1. Анализ и обобщение литературных данных по существующим методам расчета разреженных течений газа и плазмы;
2. Постановка задачи моделирования струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в диапазоне чисел Кнудсена для несущего газа $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$;
3. Разработка численного метода решения задачи моделирования струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме;
4. Разработка комплекса программ расчета струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме;
5. Проведение численных экспериментов по расчету характеристик невозмущенной струи ВЧ-плазмы пониженного давления и при обтекании твёрдого тела струей ВЧ-плазмы пониженного давления;
6. Разработка рекомендаций по выбору параметров течения рабочего газа для обработки изделий в потоке ВЧ-плазмы.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Впервые разработана математическая модель двухкомпонентного струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме течения для чисел Кнудсена $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$, сочетающая кинетическую модель на основе уравнения Больцмана для течения несущего газа и модель сплошной среды для течения газа заряженных частиц;
2. Разработан численный метод решения задачи моделирования струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме на основе соединения метода прямого статистического моделирования (ПСМ) для расчета характеристик течения нейтральных атомов и метода конечных объемов для расчета характеристик потока заряженных

частиц;

3. В результате численных экспериментов обнаружен эффект зоны перегрева по периметру струи на выходе из плазмотрона, который подтвержден экспериментальными исследованиями, то есть разработанная методика расчета и модель имеют предсказательный характер;

4. Выявлены основные закономерности течения ВЧ-плазмы пониженного давления в свободном потоке и при обтекании твердого тела.

Практическая значимость работы.

Разработан программный комплекс для расчета основных газодинамических параметров потока ВЧ-плазмы пониженного давления для невозмущенной струи и струи с образцом. Программный комплекс позволяет на основании заданных параметров вакуумной камеры и плазмообразующего газа (конфигурация и размеры вакуумной камеры, молекулярные характеристики газа, начальное давление в камере, параметры потока на входе: расход газа, температура и скорость несущего газа, электронная концентрация и электронная температура) рассчитывать газодинамические характеристики струй ВЧ-плазмы пониженного давления: распределение скорости, давления и температуры несущего газа, концентрации электронов и электронной температуры. В результате численного моделирования сформулированы рекомендации по выбору параметров течения рабочего газа для обработки изделий в потоке ВЧ-плазмы пониженного давления.

Степень достоверности полученных результатов обеспечивается сравнением результатов математического моделирования с известными данными экспериментальных и теоретических исследований других авторов, тестированием численных методов и программ на решениях модельных задач.

На защиту выносятся следующие положения:

1. Математическая модель двухкомпонентного струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в диапазоне чисел Кнудсена $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$, сочетающая кинетическую модель на основе уравнения Больцмана течения несущего газа и модель сплошной среды для течения газа заряженных частиц;

2. Численный метод расчета характеристик струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме на основе соединения метода прямого статистического моделирования (ПСМ) для расчета характеристик потока нейтральных атомов и метода конечных объемов для расчета характеристик потока заряженных частиц;

3. Программный комплекс для расчета основных газодинамических параметров потока ВЧ-плазмы пониженного давления для невозмущенной струи и струи с образцом;

4. Закономерности струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в свободном потоке и при обтекании образца, в том числе эффект

образования зоны перегрева по периферии струи около входного отверстия вакуумной камеры;

5. Рекомендации по выбору параметров течения рабочего газа для обработки изделий в потоке ВЧ-плазмы пониженного давления;

Апробация работы и публикации.

Результаты диссертационной работы обсуждались на XXXVII Звенигородской конференции по физике плазмы и УТС (Звенигород, 2010 г.), Международной конференции «XII Харитоновские чтения «Проблемы физики высоких плотностей энергий» (Саров, 2010 г.), VIII и IX Всероссийских конференциях «Сеточные методы для краевых задач и приложения», (Казань, 2010 г. и 2012 г.), XII Всероссийском симпозиуме по прикладной и промышленной математике (весенняя сессия) (Казань, 2011 г.), Международной конференции «Физика высокочастотных разрядов» (Казань, 2011 г.), XIV Международной Израильской конференции по плазме и её приложениям (14th Israel Conference on Plasma Science and its Applications) (Израиль, 2012 г.), Международной конференции «XIV Харитоновские чтения «Мощная импульсная электрофизика» (Саров, 2012 г.), IX Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях «NPNJ'2012» (г. Алушта, 2012 г.), XVI Международной конференции по методам аэрофизических исследований (ICMAR 2012) (Казань, 2012 г.).

По результатам диссертации автором опубликовано 14 работ, в том числе 3 в изданиях, рекомендованных ВАК для публикации результатов диссертации и 1 зарегистрированная программа для ЭВМ.

Личный вклад автора в опубликованных в соавторстве работах состоит в постановке цели и задач исследований, в создании математической модели струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления, численного метода, разработке комплекса программ расчета характеристик потока ВЧ-плазмы, обобщении полученных результатов и формулировке научных выводов. Вклад автора является решающим на всех стадиях работы.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения.

В ней содержится 107 страниц печатного текста, приводится 33 рисунка и 1 таблица. Список литературы содержит 158 работ.

Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность диссертационной работы, формулируется её цель и задачи, проводится краткий анализ литературных данных, формулируется научная новизна, практическая значимость работы и положения, выносимые на защиту.

В первой главе проводится расширенный обзор существующих ма-

тематических моделей ВЧ-плазмы, обзор численных методов и пакетов прикладных программ решения задач газо- и плазмодинамики.

Анализ литературных данных показал, что газодинамические модели, охватывающие часть диапазона переходного режима течения газа характеризуются 3 подходами: модели уравнений Навье-Стокса в первом приближении, модели уравнений Навье-Стокса с введенной второй вязкостью и кинетические модели, основанные на уравнении Больцмана. Первые два подхода успешно применяются для моделирования течений газа в приближении сплошной среды и захватывают часть диапазона переходного режима течения ($Kn \leq 10^{-2}$). Третий подход, в основном, применяется для свободно-молекулярного режима течения газа ($Kn \geq 1$).

Течение ВЧ-плазмы пониженного давления осуществляется в переходном режиме при числах Кнудсена для несущего газа $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$, для которого модели типа уравнений Навье-Стокса не применимы, поэтому требуется разработка модели струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления.

Проведен обзор численных методов, основанных на гипотезе сплошной среды и методов прямого статистического моделирования для задач расчета переходного режима течения. Установлено, что для расчета течения газа в переходном режиме исследователями успешно применяется метод ПСМ Г.Бёрда и его можно использовать в качестве основы для создания численного метода расчета течения ВЧ-плазмы пониженного давления.

Обзор существующих пакетов прикладных программ для расчета газодинамики показал, что большинство пакетов ориентировано на расчеты задач в приближении сплошной среды; отсутствует возможность существенной доработки программных модулей в виду коммерческой закрытости исходного кода, а при наличии возможности написания определенных пользовательских функций (например UDF-модулей в пакете Fluent) в пакетах нет готовых решений для статистического моделирования задач газодинамики в трёхмерной постановке.

На основании проведенного анализа пакетов прикладных программ для решения задачи моделирования струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления выбран пакет OpenFOAM. Пакет OpenFOAM является открытой интегрируемой платформой, распространяемой по лицензии GNU GPL (с возможностью распространять и модифицировать). Рабочим языком кода является язык ООП C++, поэтому он обладает максимальными возможностями для модификации и создания новых моделей, используя многие наработанные библиотеки. В нём есть библиотека классов для статистического моделирования (DSMC) и библиотеки для решения задач механики сплошных сред. Универсальность языка C++, а также открытость и свободнораспространяемость пакета дают ему неоспоримые плюсы для выбора в качестве базы для создания программного комплек-

са для моделирования газодинамики струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления.

Вторая глава посвящена построению двухкомпонентной математической модели струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в диапазоне чисел Кнудсена $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$ для несущего газа.

Плазма ВЧ-разряда при давлениях плазмообразующего газа от 13.3 до 133 Па, расходе газа до 0.25 г/с, мощности, вкладываемой в разряд от 0.5 до 5 кВт, частоте генератора от 1.76 до 13.56 МГц имеет ряд свойств, существенно отличающих ее от других видов газовых разрядов. В частности, струя высокочастотных разрядов пониженного давления представляет собой не поток рекомбинирующей плазмы, а разряд, поддерживаемый между плазмотроном и колпаком вакуумной камеры.

При пониженном давлении ВЧ-плазма термически неравновесна, степень термической неравновесности $\theta = T_e/T_a = 10 - 100$, где T_e - электронная, T_a - газовая температуры.

Анализ и оценка характерных масштабов элементарных процессов в плазме показали, что в струе ВЧ-плазмы пониженного давления число Кнудсена Kn для нейтрального газа $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$, для газа ионов и электронов $5 \cdot 10^{-4} \leq Kn \leq 5 \cdot 10^{-3}$. Это означает, что течение несущего газа происходит в переходном режиме, в то время как течение заряженных частиц удовлетворяет гипотезе сплошности. Число Рейнольдса в струе ВЧ-плазмы при рассматриваемых параметрах течения $2 < Re < 700$, что соответствует ламинарному потоку.

При построении модели пренебрежем процессами прилипания электронов, возбуждения атомов, объемной рекомбинацией, образованием многозарядных ионов, эффектом Холла, проскальзыванием ионов, градиентом электронного давления, потерями энергии на излучение, влиянием заряженных частиц на характер и структуру течения. Предположим, что основным механизмом рождения заряженных частиц является ударная ионизация, среда является изотропной, не гиротропной, электрическое поле в сопутствующей системе координат совпадает с полем в лабораторной системе координат, температура ионов совпадает с температурой нейтральных атомов.

Пусть струя ВЧ-плазмы пониженного давления вытекает в цилиндрическую вакуумную камеру радиусом R_{vk} и длиной L_{vk} через выходное отверстие плазмотрона радиусом R_{rk} , которое расположено на базовой плите (рис.1.). Для границ области течения введем следующие индексные обозначения: входное отверстие вакуумной камеры - *inlet*, выходное - *outlet*, образец - *body*, остальные стенки вакуумной камеры - *walls*.

При указанных выше предположениях модель струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления описывается системой, состоящей из:

1) уравнения Больцмана для функции распределения нейтральных атомов $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$ по скоростям:

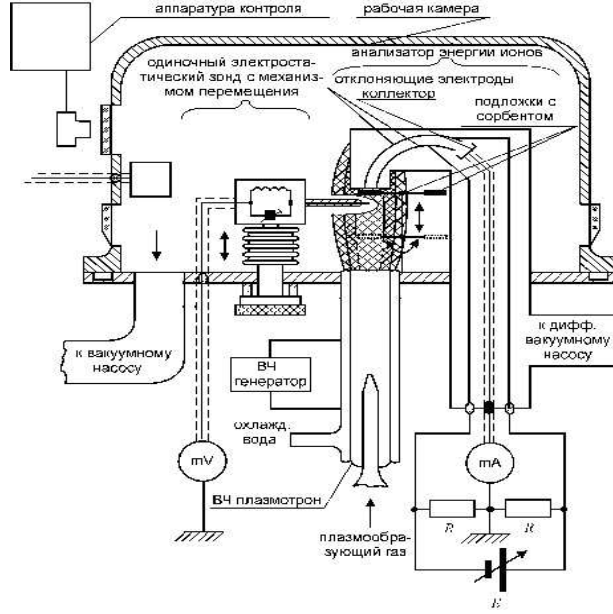


Рис. 1. Принципиальная схема плазменной установки.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \tilde{\mathbf{F}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} &= S(f), \\ f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, 0) &= f_0(\mathbf{c}, \mathbf{r}), \\ \tilde{\mathbf{F}} &= -\frac{1}{m_a} \text{grad } W_T, \end{aligned} \quad (1)$$

2) уравнений неразрывности и сохранения энергии для электронного газа:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} - \text{div} (D_a \text{grad } n_e - \mathbf{v}_a n_e) = \nu_i n_e, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} c_p \rho_e \frac{\partial T_e}{\partial t} + \text{div} \left(\lambda_e \text{grad } T_e - \frac{5}{2} k_b n_e T_e \mathbf{v}_e \right) + \\ + \frac{3}{2} k_B \delta \nu_c n_e (T_e - T_a) = \sigma E^2 - \nu_i n_e E_I. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$ - функция распределения плотности частиц нейтральной компоненты плазмы в фазовом пространстве, \mathbf{c} и \mathbf{r} — вектора скоростей и координат соответственно, f_0 - максвелловская функция распределения по скоростям, $S(f)$ - интеграл столкновений, $\tilde{\mathbf{F}}$ - приведенная сила, действующая на нейтральные атомы в процессе упругих соударений с электронами, W_T - энергия, передаваемая нейтральным атомам электронами в процессе упругих соударений, n_e - концентрация электронов, \mathbf{v}_e -

вектор скорости электронов, D_a - коэффициент амбиполярной диффузии, ν_i - частота ионизации, λ_e - коэффициент теплопроводности электронного газа, c_p - теплоёмкость электронного газа, k_B - постоянная Больцмана, E_i - потенциал ионизации, ν_c - частота упругих столкновений электронов с атомами и ионами, σ - проводимость плазмы, $\delta = 2m_e/m_a$, m_a - масса атома, m_e - масса электрона.

Коэффициенты D_a , ν_i , λ_e в уравнениях являются функциями электронной температуры T_e ,

$$\mathbf{v}_a(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{c} f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{c}, \quad (4)$$

$$\mathbf{v}_e = \mathbf{v}_a - (D_a/n_e) \text{grad } n_e, \quad \sigma = \frac{n_e e^2 \nu_c}{m_e (\nu_c^2 + \omega^2)},$$

Граничные условия для уравнения (1) устанавливаются при реализации численной схемы методом ПСМ Г.Бёрда [G. A. Bird, Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, 496 с.]. Уравнения (2)-(3) дополняются следующими граничными и начальными условиями:

$$\begin{aligned} n_e|_{\text{inlet}} &= n_{e_{\text{inlet}}}, & n_e|_{\text{outlet}} &= 0, \\ n_e|_{\text{walls}} &= 0, & n_e|_{\text{body}} &= 0, & n_e|_{t=0} &= n_{e_0} \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} T_e|_{\text{inlet}} &= T_{e_{\text{inlet}}}, & T_e|_{\text{outlet}} &= T_{e_{\text{room}}}, \\ T_e|_{\text{walls}} &= T_{e_{\text{room}}}, & \left. \frac{\partial T_e}{\partial \mathbf{n}} \right|_{\text{body}} &= 0, & T_e|_{t=0} &= T_{e_0} \end{aligned} \quad (6)$$

Таким образом, математическая модель струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления является комбинированной: течение несущего газа описывается уравнением Больцмана (1), течение электронного газа - уравнениями (2)-(3).

В третьей главе описан численный метод решения задачи расчета характеристик струйного течения ВЧ-плазмы при пониженных давлениях и описан программный комплекс для расчета характеристик потока ВЧ-плазмы. Уравнение Больцмана решается с помощью метода ПСМ, а уравнения диффузии и электронной теплопроводности - методом конечных объемов (МКО).

Одним из ведущих инструментов для численного решения прикладных задач динамики разреженного газа является группа методов прямого статистического моделирования. Метод ПСМ Г.Бёрда успешно применяется для широкого класса задач, в том числе и для расчета течения газа

в переходном режиме. Метод Г.Бёрда основан на расщеплении уравнения Больцмана по процессам. В методе производится разбиение расчетной области по ячейкам в которых происходят процессы столкновения и передачи энергии, а размер ячейки подбирается в зависимости от длины свободного пробега. Метод Г.Бёрда хорошо описывает газодинамические процессы в переходном режиме для течения нейтральных разреженных газов.

Поток плазмы отличается от потока нейтрального газа наличием распределенного по объему источника тепла, так как в результате упругих столкновений электронов с атомами и ионами происходит нагрев тяжелых частиц. Частота упругих столкновений, при которых происходит обмен энергией между частицами плазмы, в ВЧ-разряде пониженного давления $\nu_c \sim 10^{10} - 10^{11}$ Гц. В упругих столкновениях электроны передают атомам энергию

$$E_c = \frac{3}{2} k_B \delta \nu_c n_e (T_e - T_a) \quad (7)$$

Удельную мощность распределенного источника тепла можно записать в виде

$$W_T = \int E_c dV dt, \quad (8)$$

где dV - элемент объёма.

В связи с этим применение метода Г.Бёрда для решения задачи моделирования потока ВЧ-плазмы пониженного давления требует его модификации, учитывающей наличие распределенного источника тепла и согласования с моделью сплошной среды для электронного газа.

Для решения системы (1)-(4) строится двухступенчатый итерационный процесс. В начале модифицированным методом ПСМ Г.Бёрда находится решение задачи (1), из которой определяются \mathbf{v}_a и T_a . Эти значения используются далее для решения краевых задач (2), (5) и (3), (6) методом конечных объёмов. Далее из подсистем (2) и (3) находятся n_e и T_e , которые используются в задаче (1) на следующем шаге итерационного процесса. Процесс продолжается до достижения сходимости, которая оценивалась отношением последовательных приближений.

Для решения уравнения Больцмана в качестве основной расчетной единицы выбран элементарный объём, содержащий 10^{14} атомов газа (мезочастица). Считается, что в мезочастице все атомы обладают одинаковыми характеристиками, то есть мезочастица представляет весь ансамбль атомов выбранного элементарного объема.

Для решения уравнения (1) в работе используется модифицированный подход Г.Бёрда, включающий в себя расчет скоростей с учётом распределенного источника энергии, удельной мощностью (8).

В связи с тем, что МКО является интегро-интерполяционным методом, расчетная сетка в методе МКО совмещена с разбиением по ячейкам расчетной области в методе ПСМ.

Нелинейные краевые задачи в (2)-(6) линеаризуются методом сноса нелинейности на предыдущий слой. Полученные в результате линейные дифференциальные уравнения дискретизируются с помощью метода конечных объемов.

Для расчета основных газодинамических параметров потока ВЧ-плазмы пониженного давления разработан программный комплекс, который позволяет найти пространственные распределения $\mathbf{v}_a, P_a, T_a, n_e, T_e$ в заданной 3D-геометрии вакуумной камеры как для невозмущенной струи, так и для струи с образцом.

Комплекс программ написан на языке ООП C++ в среде OpenFOAM (использует библиотеки DSMC и FVM) и работает под управлением ОС Linux.

Программный комплекс состоит из следующих компонент:

- Модуль (bash-скрипт) для моделирования различных замкнутых 3D-геометрий цилиндрической вакуумной камеры и различных расположений цилиндрического образца внутри вакуумной камеры для последующей генерации сетки утилитой blockMesh,
- Модуль (case-пакет в нотации OpenFoam), подготавливающий краевые и начальные условия для проведения расчетов пакетом программ для решения системы (1)-(4),
- Пакет программ, работающий под ОС Linux, позволяющий рассчитывать основные характеристики потока ВЧ-плазмы в вакуумной камере пониженного давления в заданной 3D-геометрии.

Программный комплекс позволяет на основании заданных параметров вакуумной камеры и плазмообразующего газа (конфигурация и размеры вакуумной камеры, молекулярные характеристики газа, начальное давление в камере, параметры потока на входе: расход газа, температура и скорость несущего газа, электронная концентрация и электронная температура) рассчитывать газодинамические характеристики струй ВЧ-плазмы пониженного давления: распределение скорости, давления и температуры несущего газа, концентрации электронов и электронной температуры как для невозмущенной струи, так и при наличии в струе образца.

При расчетах с помощью программного комплекса используется технология MPI для передачи данных при распараллеливании вычислений по ячейкам расчетной области. Технология позволяет ускорить расчеты в два и более раза в зависимости от числа используемых ядер вычислительного кластера с общей оперативной памятью.

В четвертой главе представлены результаты расчетов характеристик струй ВЧ-плазмы пониженного давления для невозмущенного потока и струи с образцом при различных режимах течения плазмы. Расчеты про-

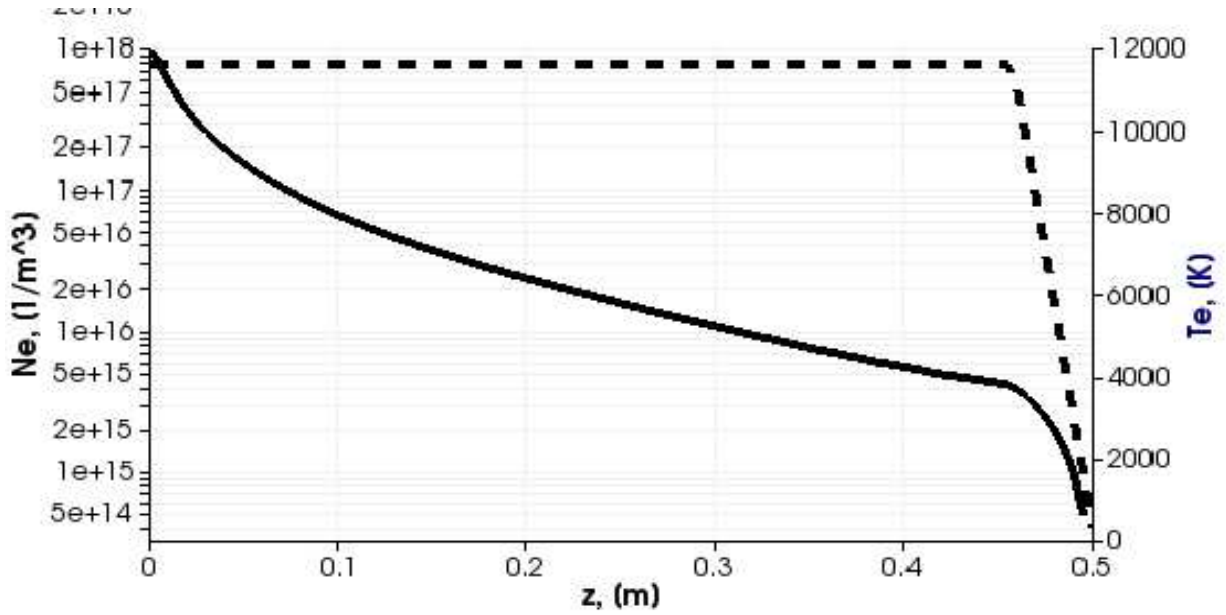


Рис. 2. Распределение электронной температуры T_e и электронной концентрации n_e в продольном сечении невозмущенной струи ($R_{rk} = 0.012$ м, $R_{vk} = 0.2$ м, $L_{vk} = 0.5$ м, $G = 0.08$ г/с, $T_{inlet} = 400$ К, $V_{inlet} = 350$ м/с, $n_{e_{inlet}} = 10^{18}$ 1/м³, $T_{e_{inlet}} = 11600$ К).

водились для потока нейтральных атомов с учетом модельного распределенного источника тепла и для потока ВЧ-плазмы.

Для проверки работоспособности комплекса и влияния распределенного источника тепла на характеристики струи плазмы проведены численные расчеты с модельными распределениями $T_e(x, y, z)$ и $n_e(x, y, z)$.

Расчет проводился для модели вакуумной камеры радиусом $R_{vk} = 0.1 \div 0.3$ м, радиусом входного отверстия $R_{rk} = 0.005 \div 0.02$ м и длиной камеры $L_{vk} = 0.2 \div 0.6$ м.

Предполагается, что через входное отверстие вакуумной камеры втекает поток плазмы аргона с давлением на входе в диапазоне $P_{inlet} = 35 \div 165$ Па, температурой $T_{inlet} = 300 \div 700$ К, скоростью потока $V_{inlet} = 300 \div 1000$ м/с и электронной температурой $T_e = 10000 \div 40000$ К. Расход газа составлял $G \sim 0.02 - 0.24$ г/с, степень ионизации в камере $\Delta_n = 10^{-7} - 10^{-4}$, начальное давление в камере $P_0 = 3.5 \div 16.5$ Па. Обработываемое изделие моделировалось цилиндром размерами $R_b = 0.01 \div 0.06$ м, $L_b = 0.01 \div 0.06$ м, который располагался по центру потока на расстоянии $L_{tb} = 0.03 \div 0.3$ м от входного отверстия. Плоскость образца перпендикулярна потоку.

Расчеты показали, что время установления течения до стационарного состояния при данных условиях составляло 10^{-2} с.

В результате численных расчетов установлены основные закономерности струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления.

Расчёты показали, что концентрация электронов n_e убывает вдоль струи (рис. 2.) с 10^{18} до 10^{14} , а T_e распределена практически равномерно

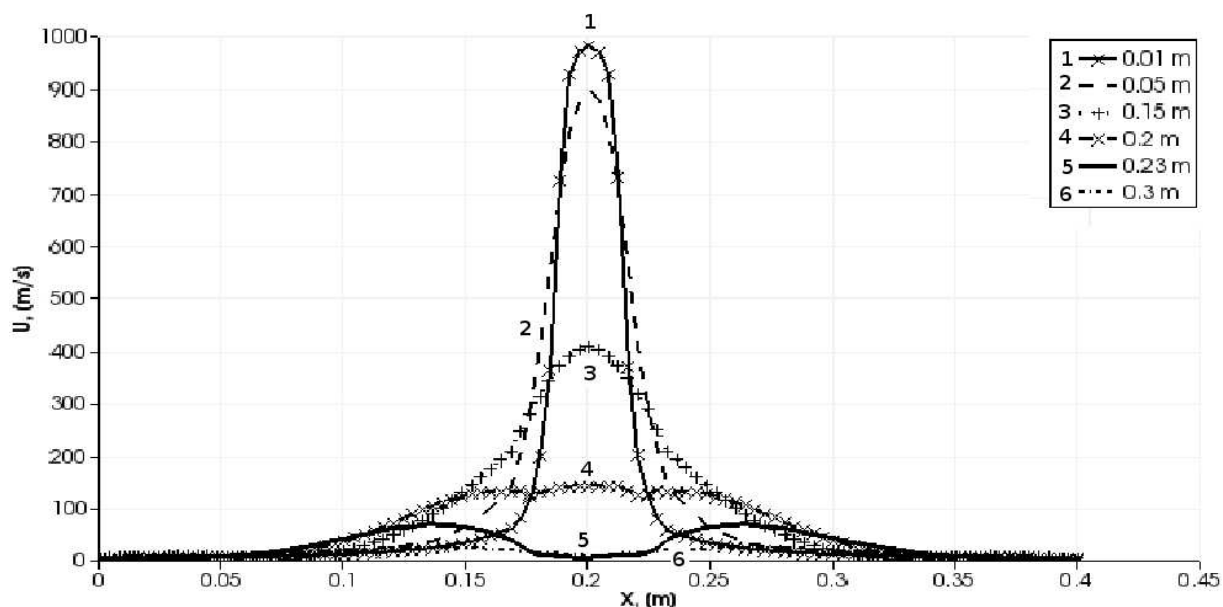


Рис. 3. Радиальное распределение модуля скорости U в поперечном сечении струи при наличии образца. Образец располагался на расстоянии $L_{tb} = 0.2$ м от входного отверстия ($R_{rk} = 0.012$ м, $R_{vk} = 0.2$ м, $L_{vk} = 0.5$ м, $G = 0.24$ г/с, $T_{inlet} = 500$ К, $V_{inlet} = 1000$ м/с).

по камере и резко убывает у стенок вакуумной камеры.

В невозмущенной струе профиль поперечного сечения скорости имеет колоколообразную форму, причем с удалением от входного отверстия высота «колокола» (значение скорости по оси потока) уменьшается, а основание увеличивается, то есть струя расширяется.

Из рис. 3. видно, что в модели с образцом скорость убывает при приближении потока газа к телу, а далее вокруг тела становится заметно больше, чем в области столкновения потока с плоскостью образца (кривые 4, 5), что соответствует экспериментальной картине движения газа.

Профили давления в невозмущенной струе – колоколообразные, за исключением профиля в начале струи. На входе вокруг струи создается зона разрежения. Это вызвано, по видимому, эффектом «подсоса» окружающего газа в струю. Давление выравнивается на небольшом удалении (около 0.05 м) от входного отверстия.

При помещении в струю образца (рис. 4.), давление на удалении $0.05 \div 0.15$ м от входного отверстия сначала падает (кривые 2, 3), затем при подходе газа к образцу – нарастает (кривая 4), что связано с торможением потока. За образцом создается область пониженного давления, а затем оно выравнивается, как и в модели без образца.

В результате численных экспериментов обнаружен эффект перегрева струи по периферии. Из рис. 5. видно, что максимальное значение температуры создается на периферии струи, а минимум температуры достигается в центре (кривые 1, 2). Температура в поперечном сечении быстро

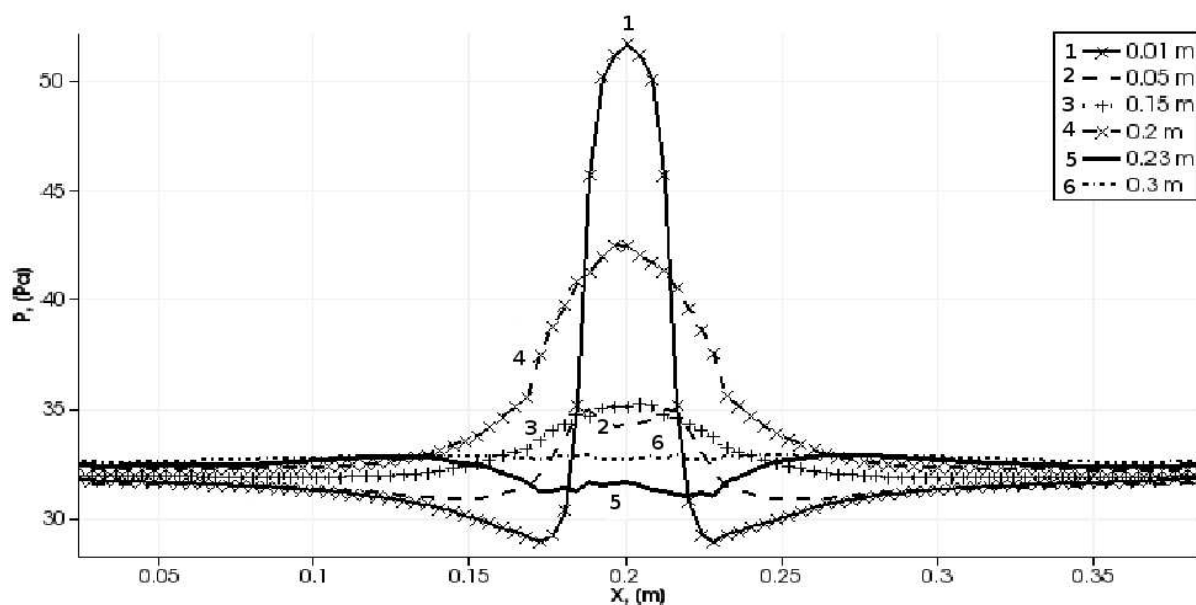


Рис. 4. Радиальное распределение давления P в поперечном сечении струи при наличии образца. Образец располагался на расстоянии $L_{tb} = 0.2$ м от входного отверстия ($R_{rk} = 0.012$ м, $R_{vk} = 0.2$ м, $L_{vk} = 0.5$ м, $G = 0.24$ г/с, $T_{inlet} = 500$ К, $V_{inlet} = 1000$ м/с).

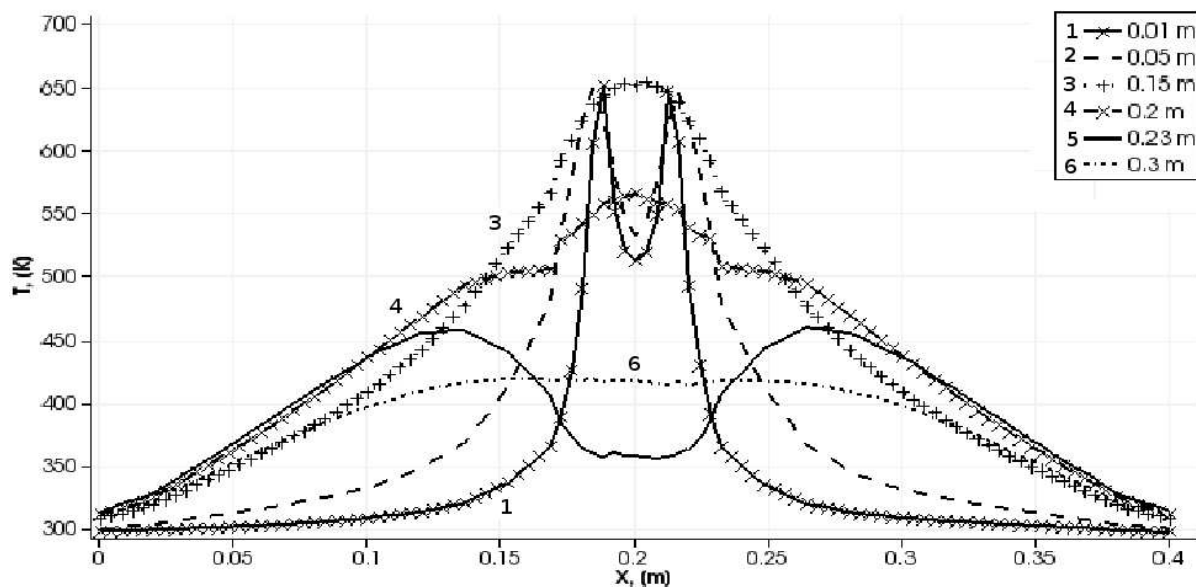


Рис. 5. Радиальное распределение температуры T_a в поперечном сечении струи при наличии образца. Образец располагался на расстоянии $L_{tb} = 0.2$ м от входного отверстия ($R_{rk} = 0.012$ м, $R_{vk} = 0.2$ м, $L_{vk} = 0.5$ м, $G = 0.24$ г/с, $T_{inlet} = 500$ К, $V_{inlet} = 1000$ м/с).

спадает при удалении от струи.

Профили температуры становятся колоколообразными на расстоянии 0.15 м от входного отверстия вакуумной камеры, потом плавно уменьшаются с удалением от струи, при этом выравнивание температуры в поперечном сечении не происходит. Эффект нагрева газа по периферии струи вызван, по-видимому, резким торможением молекул струи газа при столкновении с неподвижным газом в камере.

На основании проведенных расчетов разработаны рекомендации по выбору зоны равномерной обработки изделий в струе ВЧ-плазмы пониженного давления. В частности, для равномерной обработки рекомендуется устанавливать расход газа не более 0.2 г/с и изделие размещать на расстоянии не менее 10 см от выходного отверстия плазмотрона.

Установленные закономерности струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными, разработанная методика расчета и модель имеют предсказательный характер.

Основные результаты диссертации:

1. Впервые разработана математическая модель двухкомпонентного струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме течения для чисел Кнудсена $8 \cdot 10^{-3} \leq Kn \leq 7 \cdot 10^{-2}$, сочетающая кинетическую модель на основе уравнения Больцмана для течения несущего газа и модель сплошной среды для газа заряженных частиц;

2. Разработан численный метод решения задачи моделирования струйного течения ВЧ-плазмы пониженного давления в переходном режиме на основе соединения метода прямого статистического моделирования для расчета характеристик потока нейтральных атомов и метода конечных объемов для расчета характеристик потока заряженных частиц;

3. Разработан программный комплекс для расчета основных газодинамических параметров потока ВЧ-плазмы пониженного давления для невозмущенной струи и струи с образцом. Программный комплекс позволяет на основании заданных параметров вакуумной камеры и плазмообразующего газа (конфигурация и размеры вакуумной камеры, молекулярные характеристики газа, начальное давление в камере, параметры потока на входе: расход газа, температура и скорость несущего газа, электронная концентрация и электронная температура) рассчитывать газодинамические характеристики струй ВЧ-плазмы пониженного давления: распределение скорости, давления и температуры несущего газа, концентрации электронов и электронной температуры;

4. В результате проведенных численных экспериментов выявлены закономерности течения ВЧ-плазмы пониженного давления в свободном потоке и при обтекании твердого тела, в том числе обнаружен эффект зоны перегрева газа по периметру струи на выходе из плазмотрона, который подтвержден экспериментальными исследованиями, то есть разработан-

ная методика расчета и модель имеют предсказательный характер;

5. Даны рекомендации по выбору параметров течения рабочего газа для обработки изделий в струе ВЧ-плазмы пониженного давления, обеспечивающие равномерность воздействия плазмы на поверхность изделия.

Основные публикации автора по теме диссертации

Научные статьи, опубликованные в ведущих рецензируемых научных журналах, рекомендованные ВАК РФ

1. В.С. Желтухин, А.Ю. Шемахин. Расчет газодинамики струй ВЧ-плазмы пониженного давления // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. — 2011. — Т.153, кн. 4. — С. 135–142.
2. А.А. Хубатхузин, И.Ш. Абдуллин, Э.Б. Гатина, В.С. Желтухин, А.Ю. Шемахин. Формирование наноструктурированных покрытий на поверхности титановых сплавов с помощью ВЧ-плазмы пониженного давления // Вестник Казанского технологического университета. — 2012. — № 14. — С. 37–41.
3. А.А. Хубатхузин, И.Ш. Абдуллин, Э.Б. Гатина, В.С. Желтухин, А.Ю. Шемахин. Создание наноструктурированных покрытий на изделиях развитой геометрической формы // Вестник Казанского технологического университета. — 2012. — № 14. — С. 43–48.

Научные статьи и материалы научных конференций

4. А.Ю. Шемахин. Моделирование газодинамики струйного ВЧ разряда пониженного давления в открытой среде CSC-Elmer // Обзор. прикл. и пром. мат. — 2011 г. — Т. 18, № 2. — С. 53–54.
5. В.С. Желтухин, А.Ю. Шемахин. О моделировании потоков газа в ВЧ плазме пониженного давления // Тр. междунар. конф. «XII Харитоновские тематические научные чтения». — 19–23 апреля 2010 г. — Саров, 2010. — С. 247–249.
6. В.С. Желтухин, А.Ю. Шемахин. К расчету газодинамики струй ВЧ плазмы пониженного давления: краткий обзор // Матер. VIII Всерос. конф. «Сеточ. методы для краевых задач и приложения», — Казань, 1–5 октября 2010 г. — С. 205–209.
7. В.С. Желтухин, А.Ю. Шемахин, Е.М. Кацевман. Моделирование газодинамики струйного ВЧ разряда пониженного давления с помощью свободного программного обеспечения // Матер. междунар. конф. «Физика высокочастотных разрядов», — Казань: КГТУ, 2011, — С. 86–87.

8. В.С. Желтухин, А.Ю. Шемахин. О моделировании потоков ВЧ плазмы пониженного давления // Матер. XXXVII Междунар. (Звенигор.) конф. по физ. плазмы и УТС, 8–12 февраля 2010 г., — Звенигород 2010. — С. 153.
9. A.Yu. Shemakhin, V.S. Jeltoukhin. Calculation of gas dynamics flows of high frequency plasma in low pressure and solve of flow around body problem. // Матер. Междунар. конф. 14th Israel Conference on Plasma Science and its Applications, 28 февраля, 2012 г., — Израиль, Реховот, 2012 — С. 42.
10. В.С. Желтухин, А.Ю. Шемахин. Расчет газодинамики струй ВЧ плазмы пониженного давления в вакуумной камере с образцом // Тр. междунар. конф. «XIV Харитоновские тематические научные чтения». — 12–16 мая 2012 г. — Саров, 2012. — С. 195–204.
11. В.С. Желтухин, А.Ю. Шемахин. Расчет потоков ВЧ-плазмы пониженного давления с применением методов прямого моделирования” // Матер. IX Междунар. конф. по неравновесным процессам в соплах и струях, 25–31 мая 2012 г., г. Алушта, Украина, С. 196 – 197.
12. V. Zheltukhin, A. Shemakhin. Simulation of RF plasma streams at low pressure // Труды VIII международной конференции PPPT-7, Минск 2012 г. С. 283 — 286.
13. V.S. Zheltukhin, A.Yu. Shemakhin. Calculation of gas dynamics of radio frequency plasma flows at low pressure and solving specimen circumfluence problem // Труды XVI международной конференции по методам аэрофизических исследований ISMAR-2012, Казань, 2012 г., с. 292.

Программа для ЭВМ

14. А.Ю. Шемахин, В.С. Желтухин. PIGSolver - Программа для расчета основных характеристик течения частично-ионизованного газа низкого давления [Электронный ресурс]:— Электрон, дан. и прогр. — Казань: ООО «SpaceLAB КФУ», 2012. — 1 электрон, опт. Диск (DVD-ROM): Систем. требования: ПК Intel (x64); Linux Debian Mint 10. - № гос. регистрации 0321203662.

